

有機化学の分野では、膨大な数の有機化合物や有機合成反応がデータベースに蓄積されている。米国ノースウェスタン大学の Grzybowski 教授のグループは、約 150 年分のデータを分析し、有機化学の発展の方向性を探る初めての試みを行った。

Grzybowski 教授らは、データベースに登録された 1850 年から 2004 年までの約 600 万の有機化合物および関連する有機合成反応を分析した。その結果、①最も多く使用される反応の原料化合物の分子量および目的化合物の分子量は約 150 年間ほぼ一定である、②目的化合物の分子量は原料化合物の分子量の一次式でほぼ記述できる、などの傾向があることが分かったとしている。さらに、医薬品の中でも重要とされる化合物の分子量分布が有機化合物データベース全体の分布とほぼ同じであることなども突き止めた。Grzybowski 教授らは、これまでの有機化学分野の進展にはある一定の傾向があり、これらの傾向から有機化学分野の今後の発展の方向性も推測できると述べている。

トピックス 2 150 年分の蓄積データの分析により有機化学の発展方向を探る

これまでに膨大な数の有機化合物および有機合成反応が報告されているが、蓄積されたデータを総合的に分析しようとする試みはなかった。米国ノースウェスタン大の B. A. Grzybowski 教授のグループは、約 150 年の間に蓄積されたデータをコンピュータ分析することにより有機化学分野の今後の発展の方向性を推測することが出来るとする論文を 2005 年 11 月に発表した (Angew. Chem. Int. Ed. 44, 7263)。

Grzybowski 教授らは有機化学分野で最も大きなデータベースの一つであるバイルシュタイン・データベース (Beilstein database) に蓄積されたデータを用い、1850 年から 2004 年に登録された有機化合物 (触媒、溶媒のみに使用されたものは除外) 約 600 万件および関連する有機合成反応 (同一反応については最も早く報告されたもののみを採用) についてコンピュータで分析を行った。データ分析に際し、基礎データとして、①化合物は、分子構造を考慮すると複雑になり過ぎるため、分子量のみで規定する、②化学反応は、原料物質から生成物に向かう矢印で表現する、という方針により、分子ベースの化合物を表示するドットとそれらを結ぶ矢印から成る図を作成した。またその経時変化も分かるようにした。

Grzybowski 教授らの分析によれば、

- (1)登録された化合物の平均分子量は、1850 年の約 200g/mol から 2004 年の約 350g/mol まで増加した。一方、反応の原料として最も多く使用され

る化合物の分子量、および最も多い目的化合物の分子量は、それぞれ約 150g/mol、250g/mol で、ほぼ一定であった。

- (2)全ての登録された有機化学反応において、目的化合物の分子量は、原料化合物の分子量の一次式でほぼ整理される。
(3)医薬品の中で最も重要とされる 1382 の化合物¹⁾と Beilstein database に登録されている化合物の分子量分布はほぼ同じであった。
(4)上記 1382 の医薬品および工業的に最も重要とされる 300 の化学品²⁾は、データベースからランダムに選んだ 2,000 の化合物に比べて矢印の数が多く、しかも長期間、この傾向が持続している。
(5)上記工業的に最も重要とされる 300 の化学品について調べると、矢印の数が多ほど製造コストが安くなる傾向にある。

以上の結果から Grzybowski 教授らは、(a)これまでの有機化学分野の進展にはある一定の傾向があり、これらを外挿することにより今後の発展の方向性を推測することができる、(b)今回用いた分析手法は、医薬品・工業薬品など産業にとって有用な有機化合物に広く適用しうる方法である、としている。

今回の検討結果は、これまでの有機化学分野の進展には、ある一定の方向性があることを示した点が評価される。必ずしも今後の発展の方向を明確にしたとまでは言いがたいが、初めての試みとして、今後の更なる展開に期待したい。

Advanced Synthesis & Catalysis Research (ASC 化研) 藤原 祐三 氏の投稿をもとに科学技術動向研究センターにて作成

- 参 考 1) Medical Essential Drug Database
2) Chemical Market Reporter, March 7, 2005